

福井大学研究シーズデータ

名前・学部・学科等	玉井 良則・工学部・物理工学科				
研究情報の分類	シーズ 特許 新製品 分析/解析 調査				
研究分野の分類	1 (3,4,9)	以下の18項目から一つ選び番号を左欄に記入する。 1.物理系 2.エネルギー系 3.化学系 4.バイオ系 5.環境系 6.海洋・宇宙系 7.交通系 8.機械系 9.材料系 10.電子・電気系 11.情報系 12.建築・建設系 13.医学系 14.健康・保険系 15.看護・福祉系 16.農業・林業系 17.水産・畜産系 18.その他			
重点研究分野への該当	I T ナノ バイオ 環境・エネルギー その他				
キーワード(5個以内)	シミュレーション	材料設計	機能性膜	生体分子	計算科学
研究情報の名称	計算機シミュレーションによるサブナノスケールサイエンスの確立				
概要					
<p><u>ナノおよびサブナノメートルスケールの分子構造や電子状態を高度に制御する技術の開発が、今後、さまざまな研究分野において非常に重要になると考えられる。これを実現するためには、分子シミュレーション法や分子軌道法などの計算物理、計算化学的手法が極めて有用である。これまでに、分子シミュレーションソフトウェア PAMPS の開発をおこない、これを、生物・生命科学、材料開発、物理工学などの様々な分野の問題に適用し、計算科学的手法によるナノ・サブナノスケールサイエンスの手法の確立をめざして研究を進めている。</u></p> <p>具体的には、以下のテーマについて研究を推進している。</p> <ol style="list-style-type: none">1. 分子キャビティーを利用した「スマートメンブレン」の分子設計と機能予測をおこない、分離性能の飛躍的な向上を図る。2. 高分子結晶科学の新展開を目指したシミュレーション手法を開発する。3. 水と生体分子が織り成す種々の生命現象について、分子レベルの仕組みを物理化学的観点から明らかにする。					
グラフィカルな社会還元までのチャート					
<p>The diagram illustrates the flow from 'シーズ' (Seed) to '社会還元' (Social Contribution). It starts with '分子シミュレーションプログラム PAMPS' and 'サブナノスケールサイエンスの確立', both leading to '計算化学' and '計算物理'. These then lead to 'ナノテクノロジー 材料設計, 分子設計' and 'スマートメンブレン 機能性分離膜の設計'. The final stage is '水と生体分子 生命現象の解明'. A large arrow at the bottom points from '計算機シミュレーション' to '実験' (Experiment), labeled '有機的結合' (Organic Connection).</p>					
関連している企業・大学・団体等	科学研究費補助金 特定領域研究（京大，名工大，分子研 etc.）				
関連する特許 1 件	該当なし				
関連する論文 1 編	Y. Tamai, M. Fukuda, Polymer 44 , 3279 (2003)				